



TITLE:

カーボンナノリングとカーボンナノチューブの相互作用

AUTHOR(S):

三木, 康嗣

CITATION:

三木, 康嗣. カーボンナノリングとカーボンナノチューブの相互作用. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2019, 2018: 45-45

ISSUE DATE:

2019-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/241172>

RIGHT:

カーボンナノリングとカーボンナノチューブの相互作用

Interaction of Carbon Nanorings with Carbon Nanotubes

京都大学大学院工学研究科物質エネルギー化学専攻 三木康嗣

研究成果概要

カーボンナノチューブ (CNT) は炭素クラスターとして光電変換素子、セラノスティック材料など様々な分野での応用が期待されている。化学修飾によりその機能を増大させることを目的に、パイ共役系を損傷しない超分子的な CNT の化学修飾が注目されている。本研究では、開発したカーボンナノリング[9]CPPA が π - π 相互作用により CNT と"tube-in-ring"型複合体を形成することを見出した (Figure 1a)。理論計算により、リング径とチューブ径が π - π 相互作用に適する組み合わせである場合、"tube-in-ring"型複合化が有利であると予想された (Figures 1b、1c)。[9]CPPA と直径 1.1~1.4 nm の CNT との複合体のラマン分光法や熱重量測定から "tube-in-ring"型複合体の形成が示唆された。また、透過型電子顕微鏡や原子間力顕微鏡から "tube-in-ring"型複合体の形成が確認された (Figures 1d-f)。

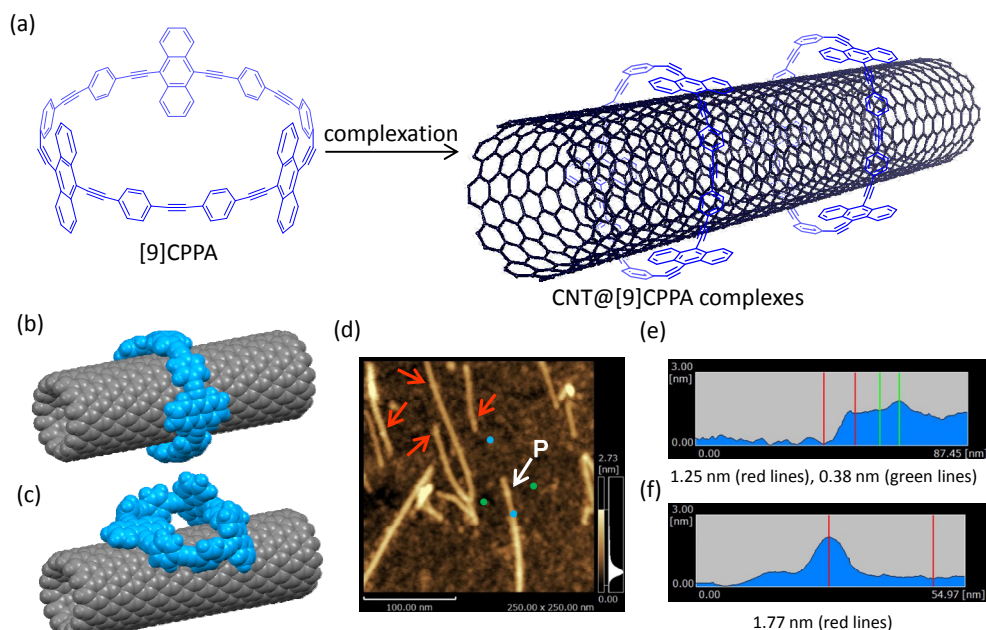


Figure 1. (a) CNT@CPPA complexes through “ring toss” method. (b) “Tube-in-ring” and (c) ring-on-tube” structures of CNT@CPPA complex of (14,0)CNT and [9]CPPA optimized with Forcite program and visualized by Mercury 3.6. Both terminals of CNT are capped with hydrogen atoms. (d) Representative SPM image of CNT@[9]CPPA. CNT@[9]CPPA were observed as bright spots pointed out by white and red arrows. Height profiles (at spot P) between two (e) blue and (f) green dots.

発表論文(謝辞あり)

K. Miki, K. Saiki, T. Umeyama, J. Baek, T. Noda, H. Imahori, Y. Sato, K. Suenaga, K. Ohe, *Small* **2018**, *14*, 1800720.